ポスト富岳が切り拓く格子QCDシミュレーション

理化学研究所 計算科学研究センター
金森 逸作

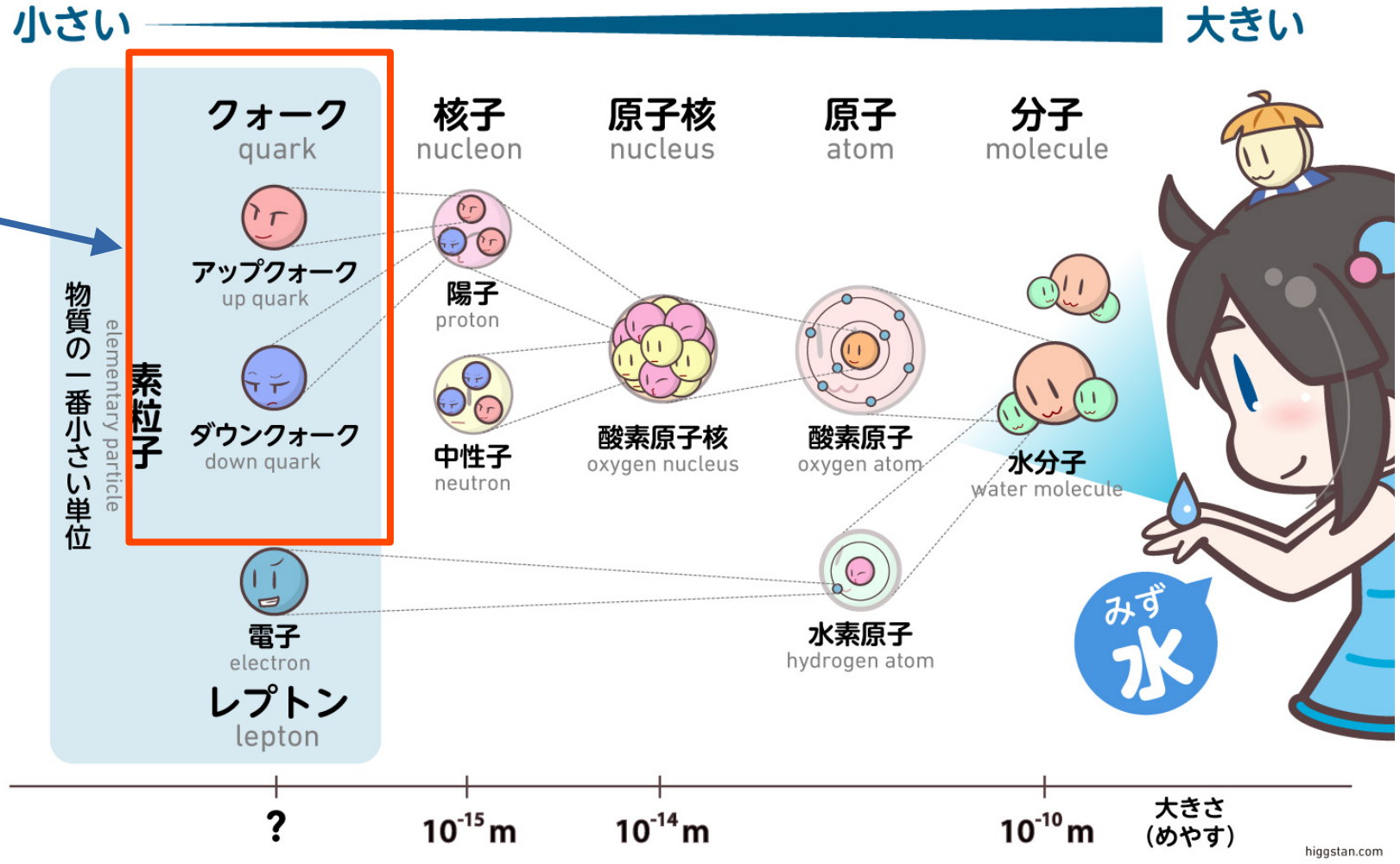
シンポジウム「ポスト富岳で拓くアプリケーションの未来」
2025年3月25日
コングレスクエア日本橋

アプリの対象：微小世界の物理学

クォークと
グルーオン

量子色力学
Quantum
ChromoDyanimcis
(QCD)

素粒子標準模型
の精密検証
（KEK加速器実験）
核力の導出



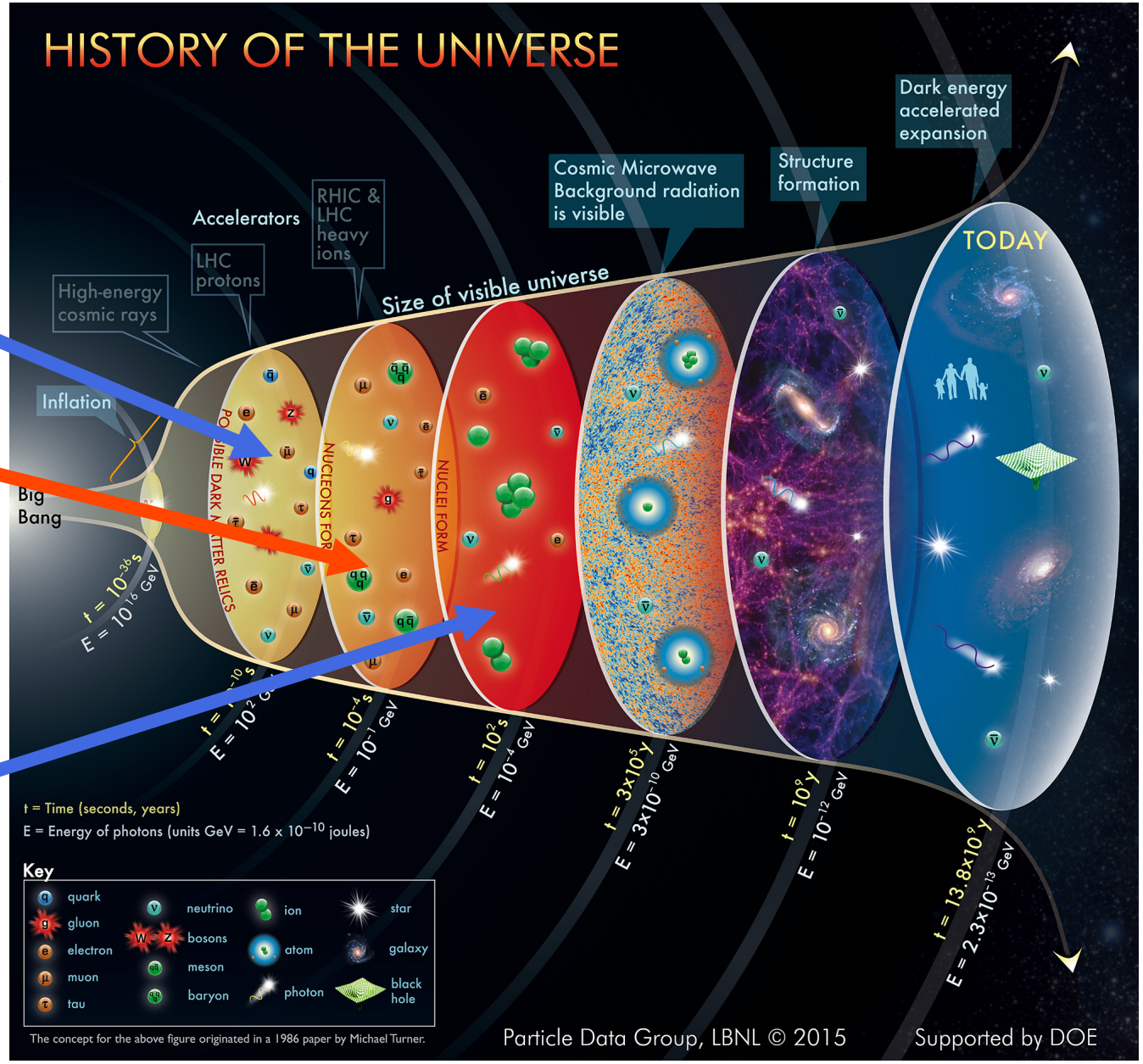
初期宇宙

10^{-10}秒後：1000兆度
クォークたちがバラバラの世界

10^{-4}秒後：1.75兆度
(～150 MeV)
陽子や中性子ができる

クォーク・グルーオンのプラズマ相からハドロン相へ
cf. 水蒸気から水へ

100秒後：10億度
原子核ができる



格子QCD

- 4次元格子上でQCDを記述
- 量子論：経路積分をモンテカルロ法で評価（シミュレーション）

$$\int \mathcal{D}U \det D[U] \mathcal{O}[U] \exp(-S[U])/Z = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathcal{O}[U_i] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

誤差

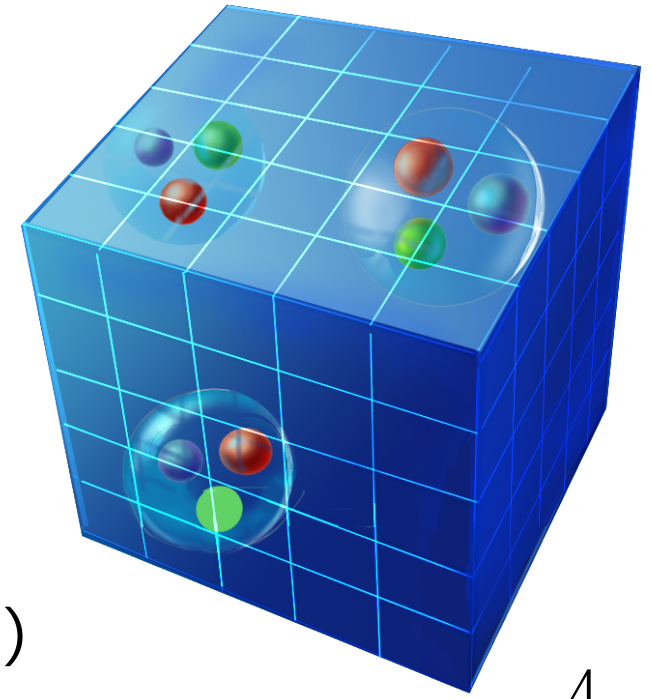
真空分極の効果
律速：線形ソルバー、反復法

測りたいもの

配位

- **配位** U_i **の質、測りたいもの** $\mathcal{O}$ **の複雑さ、統計** N
- パラメータ
  - 格子間隔
  - 格子サイズ
  - クォークの種類、質量
  - クォーク離散化の方法（対称性）
- 機械学習による高速化は発展途上（ここでは考慮しない）

「富岳」の5〜10倍ではパラメータを劇的に変えることは難しい
格子サイズ2倍→少なくとも16倍の資源



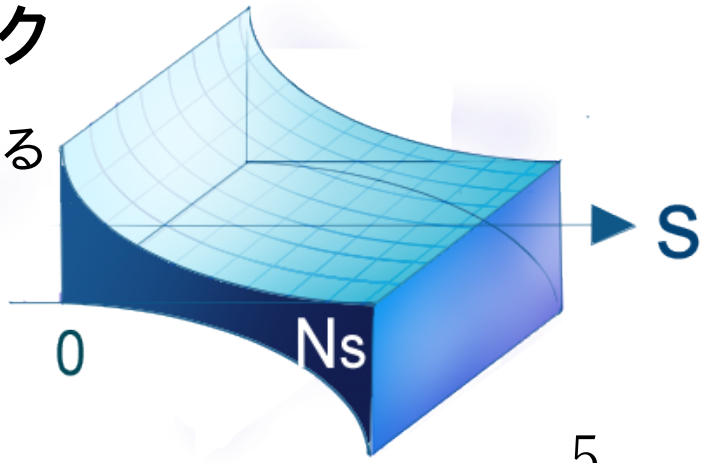
カイラル対称性をほぼ保つ離散化（ドメインウォールフェルミオン）

FS でのメインターゲット

- カイラル対称性：QCDの重要な対称性 離散化の質
- 「5次元」的な定式化　コストが高い
- 加速器実験（Belle II ＠つくばのKEK）での素粒子標準模型の精密検証
  B中間子の崩壊に関する形状因子：5% → **1%**
- b クォークが重たい（コンプトン波長が短い）ので、格子間隔は細かくしたい
- これまでの妥協：u, d クォークが実際より重たい → **物理点**
  軽いクォーク：計算コスト大 $1/m^4$ ～$1/m^5$
  有限体積効果（大きな格子）、線形ソルバーの反復数増大、自己相関
- 真空分極の効果: u, d, s クォーク → **u, d, s, c クォーク**
- 格子間隔はコード次第 線形ソルバーの改良・高速化が望まれる

実験と並び、より精密な計算へ

（素粒子標準模型の検証、新物理？）



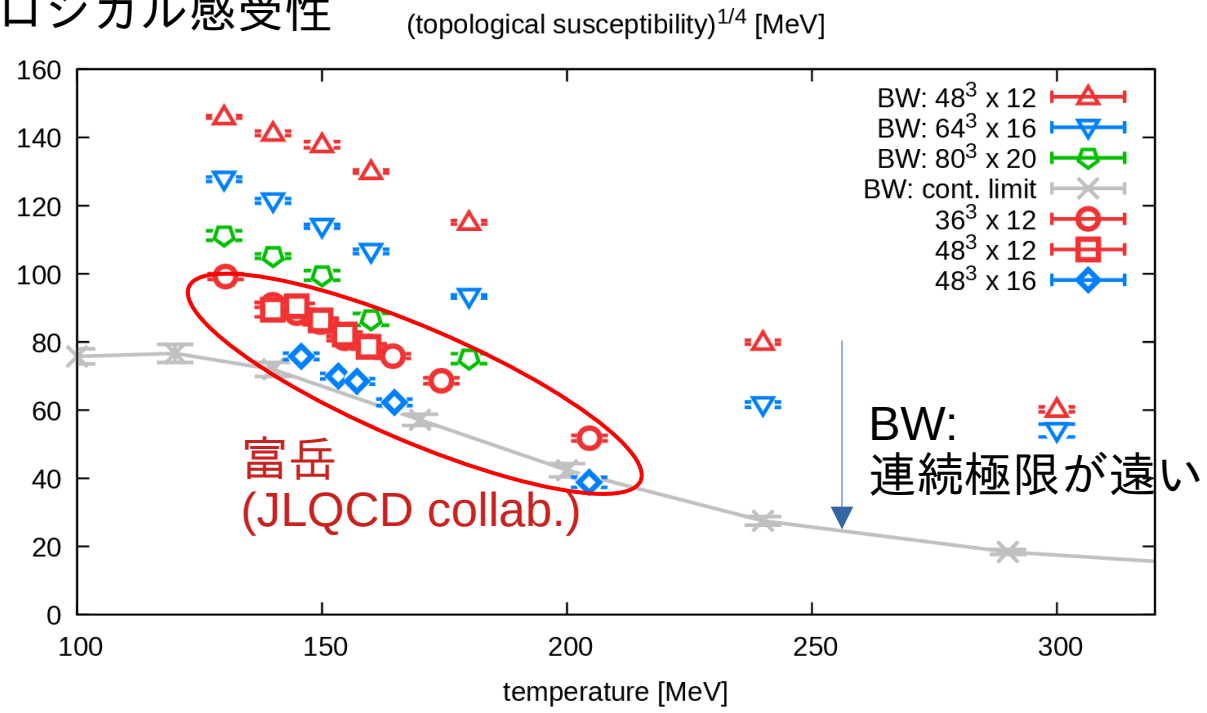
宇宙初期の物理（有限温度、ドメインウォールフェルミオン）

FS でのメインターゲット

- 多くの統計数が必要、多数の温度や体積（有限体積スケーリング）
- カイラル対称性がよい：離散化誤差が小さい　離散化の質
- 格子間隔：２点のみ（L^3x12, L^3x16）→ **3点目（L^3x20）**

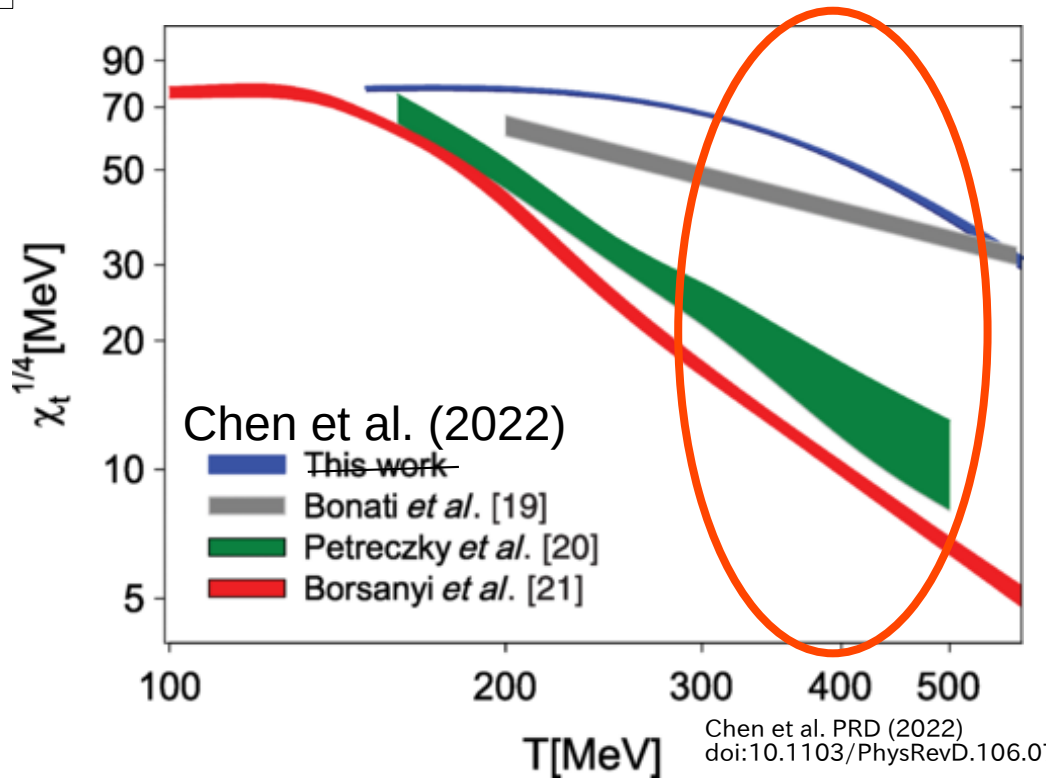
連続極限をとって、精密な物理へ

トポロジカル感受性



BW: Borsanyi et al. Nature (2016), quark はstaggered

高温で結果がバラバラ



Chen et al. PRD (2022)
doi:10.1103/PhysRevD.106.074501

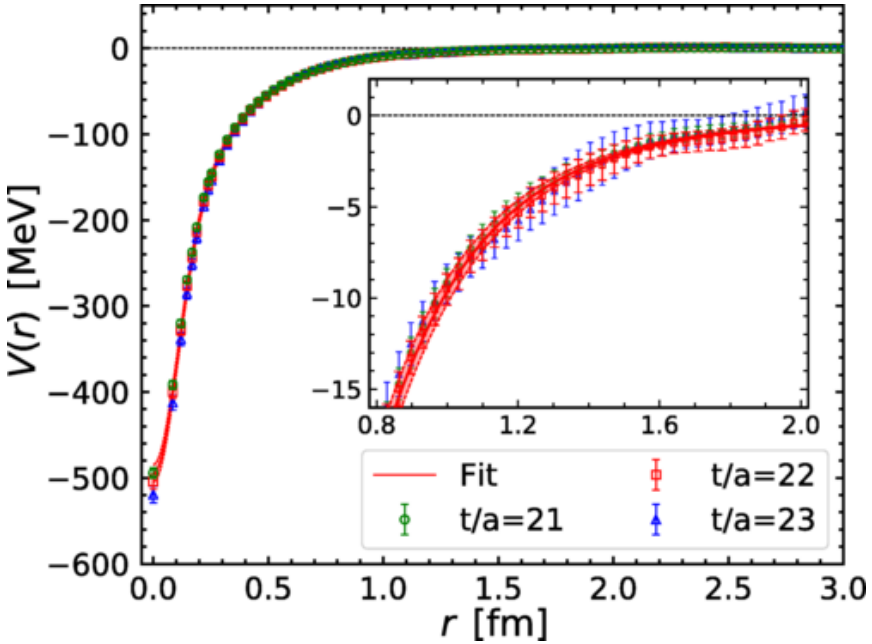
ハドロン間相互作用

- 複雑な測定、高統計が必要
- 離散化はウィルソン型
- 96x96x96x96 (a=0.088 fm) →**128x128x128x128 (a=0.064)**
- 格子間隔1点から2点へ：離散化誤差の評価
  ポスト富岳では3点目は厳しい
- u,d,s クォーク→ **u,d,s,c クォーク**
- S波、2体相互作用→**P波、3体相互作用**

HAL 法：日本で開発された手法
Aoki, Hatsuda, Ishii, Phys.Rev.Lett. 99 (2007) 022001

複数の格子間隔、より複雑な相互作用へ

D*中間子-D中間子のポテンシャル：
束縛されてテトラクォークを形成



Lyu et.al PRL (2023) doi:10.1103/PhysRevLett.131.161901

大きな格子

- 国内最大サイズの格子 256^4 (PACS 10, a=0.041 fm)　PACS collab.
  離散化はウィルソン型：カイラル対称性はよくない
- 128^4 (a=0.063 fm), 160^4(a=0.085) もある　連続極限
- 大きな物理体積: 一辺 10 fm　陽子の大きさは 1 fm 程度
- 中間子崩壊の形状因子の精密計算　運動量の解像度も高い
- 現状 2+1 フレーバー　u, d クォークは同じ質量 + s クォーク
- ポスト富岳でやれそうなこと　方針は固まっていないが、、、
  - さらに大きな格子（＝小さな格子間隔）は難しそう
  - uクォークとdクォークの質量差を取り入れる、電磁気力の効果
  - cクォークも入れる　1+1+1+1 フレーバー
- クォークの相互作用：強い力（QCD）、**電磁気力（QED）**、弱い力

電磁気力も取り入れた時代の到来

まとめ

- 一段階精密な計算へ 従来の妥協点の解消　**太字がポスト富岳**
  - DWF：ゼロ温度：カイラル対称性、微細格子（→**もっと微細？**）、連続極限、**物理点、c クォーク、誤差1%**
  - DWF：有限温度：カイラル対称性、高統計、物理点、**連続極限**
  - ハドロン間力：高統計、物理点、**複数格子間隔、cクォーク、3体力他**
  - 大格子：物理点、微細格子、連続極限、**電磁気力、cクォーク他**
- 実現するには、ポスト富岳の性能を引き出すためのコード必須
  - アルゴリズムの改良、チューニング
  - どこまで行けるかはコード次第